

ФУНКЦИИ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА TiZrNbHfTa В ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ

Балякин И.А.^{1,2,*}, Юрьев А.А.^{1,2}, Гельчинский, Б.Р.¹, Ремпель А.А.^{1,2}

¹⁾ Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: i.a.balyakin@gmail.com

RADIAL DISTRIBUTION FUNCTIONS OF TIZRNBHFTA HIGH-ENTROPY ALLOY IN A LIQUID STATE

Balyakin I.A.^{1,2,*}, Yuryev A.A.^{1,2}, Gelchinski B.R.¹, Rempel A.A.^{1,2}

¹⁾ Institute of metallurgy UB RAS, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Partial radial distribution functions (PRDFs) in liquid TiZrNbHfTa system were calculated using ab-initio molecular dynamics method. Analysis has shown that all the PRDFs are very close to each other, what leads to the high probability of single solid solution phase formation in this system at low temperatures, which is in agreement with empirical rules for TiHfZrNbTa alloy.

По определению, высокоэнтропийный сплав (ВЭС) это сплав из пяти и более компонентов, в котором атомная доля каждого компонента не должна быть менее 5% или более 35%, при этом они обладают высокой конфигурационной энтропией смешения.

Во многих случаях важно, чтобы данный сплав представлял собой однофазную систему неупорядоченного твердого раствора. Поскольку число всевозможных комбинаций химических составов ВЭСов велико, имеет смысл разработка правил формирования фаз. Возможным вариантом для точного предсказания формирования фаз в ВЭСах является исследование парциальных функций радиального распределения данных сплавов в жидком состоянии [1]. В случае, если в расплаве из N компонентов, все $N(N + 1)/2$ парциальных функций радиального распределения имеют близкие параметры, то вероятность формирования фазы неупорядоченного твердого раствора высока.

На рисунке 1 изображены некоторые парциальные функции радиального распределения для расплава TiZrNbHfTa, расстояние приведено в единицах радиуса первой координационной сферы r_1 . Остальные парциальные функции радиального распределения близки к приведённым на рисунке. Моделирование осуществлялось методом ab-initio молекулярной динамики в коде SIESTA [2]. Плотность и температура рассчитывались по правилу смесей. Временной шаг – 0.25 фс, число атомов – 250.

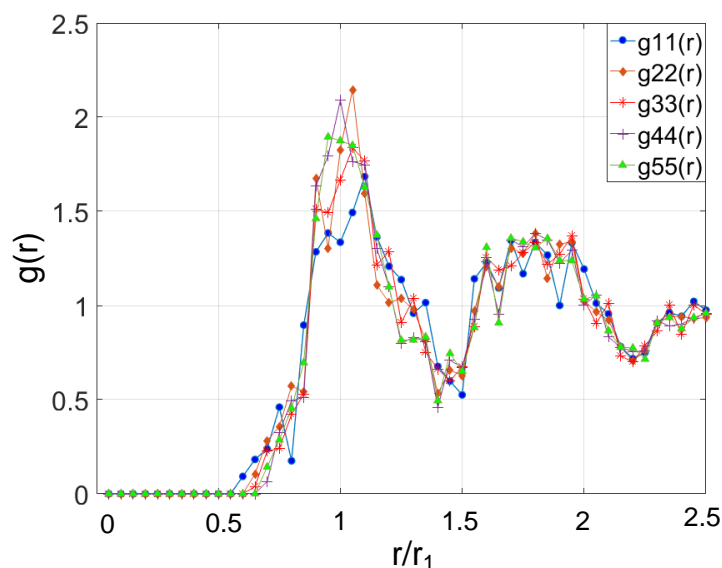


Рис. 1. Парциальные функции распределения в расплаве TiHfZrNbTa.
Обозначения элементов: 1 – Ti, 2 – Zr, 3 – Nb, 4 – Hf, 5 – Ta.

Согласно рисунку, такие параметры парциальных функций радиального распределения, как высота пиков и положение первого максимума, близки для различных пар элементов. Следовательно, существует высокая вероятность формирования неупорядоченного твердого раствора при температурах ниже температуры плавления сплава, что согласовывается с эмпирическими правилами формирования фаз для ВЭСов [3].

1. Gao M., Alman D., Entropy, 15, 4504 (2013).
2. Soler J. M. et al., J.Phys. Cond.Matter., 14, 2745 (2002).
3. Gao M. et al., High-Entropy Alloys: Fundamentals and Applications, Springer International Publishing (2016).